

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГИДРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ДИСЕЛЕНИДА НИОБИЯ*

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) TX_2 ($T = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta$; $X = S, Se, Te$) обладают слоистой структурой. Связь внутри блока X-T-X сильная, преимущественно ковалентная, сами же слои взаимодействуют между собой посредством более слабого взаимодействия, что позволяет внедрять атомы разного сорта и дает возможность получать материалы с новыми свойствами.

ДПМ обладают большим набором полиморфных форм, отличающихся координацией атомов в слоях и разным чередованием слоев с той или другой координацией. Например, соединение $NbSe_2$ кристаллизуется в трех модификациях в зависимости от температуры синтеза: 2H-, 3R- и 4H- $NbSe_2$. 2H- $NbSe_2$ обладает металлическим типом проводимости, имеет сверхпроводящий переход при температуре $T_c = 7.2$ К. В 4H модификации соединение $NbSe_2$ имеет сверхпроводящий переход при более низкой температуре $T_c = 6$ К [1].

Большой интерес представляет внедрение в такие структуры атомов водорода, который преимущественно занимает позиции в окружении Т-металла внутри блока [2]. Такие материалы могут быть использованы для хранения и перевозок водорода, для создания радиационно-стойких смазочных материалов, способных работать в водородной среде в широком температурном диапазоне.

Синтез образцов осуществлялся методом твердофазных реакций. Гидрирование проводили на аппарате типа «Сивертса» при давлениях водорода до 16.5 МПа в течение 7 часов при температуре $T = 360$ °С. Структурные исследования проводилась на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Advance. Магнитные измерения проведены с помощью СКВИД магнитометра MPMS

* © Дорошенко Н.С., Ооржак Д., Топорова Н.М., Шерокалова Е.М., 2021

(Quantum Design) в интервале температур (2–350) К. Измерения электросопротивления проводились стандартным четырехзондовым методом на поликристаллических образцах в интервале температур (6–300) К.

Результаты рентгенофазового анализа показали, что при гидрировании соединения 2H-NbSe_2 образцы H_xNbSe_2 , являются однофазными соединениями с гексагональной структурой (пространственная группа $P6_3/mmc$). При максимальном давлении изменение объема ячейки составляет $\Delta V \approx 3 \%$. Кроме того, в результате гидрирования выявлено значительное изменение величины магнитной восприимчивости. В результате аппроксимации экспериментальных зависимостей $\chi(T)$ в соответствии с законом Кюри – Вейсса было установлено, что в гидрированном соединении H_xNbSe_2 ($p_2 = 16.5$ МПа) величина эффективного магнитного момента в расчете на ион ниобия возрастает более чем в два раза, а температурно-независимый вклад, учитывающий диамагнетизм заполненных электронных оболочек и парамагнетизм свободных носителей заряда, уменьшается на два порядка в сравнении со значениями для исходного соединения 2H-NbSe_2 . А соединение 4H-NbSe_2 образует однофазный гидрид с увеличением объема элементарной ячейки на 1.6 %. Гидрирование ведет к подавлению сверхпроводящего перехода и смене типа проводимости с металлического на активационный. Установлено, что процесс гидрирования является обратимым. Температура выхода водорода, по данным терморентгенографии, составляет $T \sim 250$ К.

Список литературы

1. Калихман В.Л., Уманский Я. С. Халькогениды переходных металлов со слоистой структурой и особенности заполнения их бриллюэновой зоны // Успехи физических наук. – 1972. – Т. 108. Вып. 3. – С. 503–528. DOI: 10.3367/UFNr.0108.197211d.0503

2. Hydrogen in layer structures / M. A. Obolensky, Kh. B. Chashka et al. // J. Hydrogen Energy. – 1993. – V. 18, № 3. – P. 217–222. ISSN 0360-3199

Работа подготовлена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.2-20